

附件 4

“促进重大产业变革的催化科学”重点专项 2026 年度项目申报指南 (征求意见稿)

“促进重大产业变革的催化科学”重点专项的总体目标是实现从“纳米限域催化”、“单原子催化”等具有中国标签的新概念到形成催化基础理论框架；掌握 5-6 种人工智能驱动的纳米、亚纳米团簇、单原子、分子筛等催化材料精准合成和活性位定向调控方法；建立 2-3 种适合工业应用的高稳定催化剂制备的新方法和新概念；发展能满足不同温度、压力、外场等条件的动态催化过程表征新技术和人工智能辅助的模拟新方法；探索可再生能源与化石资源耦合利用的催化新过程，形成我国特色的高效、低能耗新过程，促进化学工业的转型升级和能源产业的可持续发展；发展适应于多样化原料的催化过程，包括 CO_2 、废塑料资源、工业废弃物、生物质等，实现碳循环；针对合成氨、合成气转化、天然气转化、绿氢制备与化学存储、石油炼制、冶金、水泥生产等重要催化过程，促进工业流程再造，产生 5-6 个工业示范验证；培养一批在催化科学领域具有重要国际影响力的领军人才。

2026 年，本重点专项将围绕催化基础理论、催化过程动

态解析、人工智能驱动的催化剂精准设计与制备、可再生能源与化石资源的催化耦合利用、资源多样化的催化循环利用新过程、促进重要催化工业工艺流程再造的催化科学等 6 个方向部署项目，拟优先支持 28 个研究方向。同一指南方向下，原则上只支持 1 项，仅在申报项目评审结果相近、技术路线明显不同时，可同时支持 2 项，并建立动态调整机制，根据中期评估结果，再择优继续支持。

申报单位根据指南支持方向，围绕重大科学问题和关键技术进行设计。项目应整体申报，须覆盖相应指南方向的全部内容。项目执行期一般为 5 年。指南方向中拟支持的项目下设课题数不超过 4 个，每个项目参与单位总数不超过 6 个。项目设 1 名负责人，每个课题设 1 名负责人。

“十五五”指南不设青年科学家项目。

1. 催化基础理论

1.1 普适性纳米限域催化体系的设计制备

研究内容：面向能源小分子（CO、CO₂、N₂、CH₄等）的精准催化转化，从表界面限域的模型催化研究出发，建立纳米限域催化的基本理论框架，实现普适性限域催化体系的理性设计和可控制备。在微观尺度上解析限域场对活性中心的物态调控，以及对反应物吸附活化、反应路径与产物选择性的调控规律；发展适配界面限域微环境与反应动态限域的实时动态表征与多尺度模拟方法，构建可定量描述界面限域

场的描述符及其与活性、选择性、稳定性之间可跨体系迁移的定量构效关系，形成贯通电子结构、动态与能量限域的普适性限域催化设计原理。发展纳米限域催化剂可控、可规模化制备方法，实现限域活性结构的精准构筑与原位动态调控；推动相关成果向 CO_x 转化与氨合成等重要化学品合成新过程的原理验证与放大转化。

考核指标：构建结构明确、限域度可控的表界面限域模型催化体系，建立原子尺度的动态构效关系并实现定量关联；提出可定量、可测量、可迁移的界面限域场描述符并建立定量构效关系，凝练可跨体系迁移的普适性限域催化设计原理，并在不少于 2 类限域构型、2 个重要反应中完成验证；实现关键催化体系的规模化制备，按设计原理理性构筑的纳米限域催化剂在 CO_x 转化与氨合成等重要化学品合成新过程实现原理与概念验证。

关键词：限域催化理论体系，界面限域场，普适性设计原理，催化剂理性设计，动态构效关系。

经费说明：概算经费参考数约 2500 – 3000 万元。

1.2 单原子催化的特异性反应探索

研究内容：围绕单原子催化剂区别于传统纳米和均相金属催化剂的吸附与化学键活化特性，探索单原子催化的特异性反应，重点围绕羰基化、氢气交换和烷烃脱氢等具有鲜明单原子催化特色的反应，通过调控配位环境，创制具有不同

位阻效应和电子效应的新型单原子催化剂，阐明载体调控单原子电子性质的内在本质及稳定机制；利用原位谱学、稳态/瞬态技术等表征技术，在原子尺度、动态时域上获得反应过程中活性中心配位环境的演变及其反应物种的衍化规律，结合多尺度模拟计算，阐明单原子位点对 C-O/C-H 键活化、氢/氘物种定向转移、C-C 偶联等关键过程的独特调控机制；开展单原子催化反应过程研究，揭示其在工况条件下的反应动力学、传质/传热等新特征；开展智能化平台建设，构建单原子催化剂结构及反应性的可靠数据库，揭示单原子位点局域结构、电子状态、界面微环境与反应活性和选择性之间的构效关系，形成对单原子催化特异性机理的系统性认识，为相关重要过程的工业化提供理论指导。

考核指标：发展 3-5 种单原子催化剂的可控制备方法，揭示载体对单原子空间位阻和电子结构的调控规律；形成对单原子催化在 C-O/C-H 键活化、氢/氘物种定向转移、C-C 偶联等的规律性认识，建立 3-5 个单原子催化剂结构—反应性的定量描述模型；实现 1-2 个单原子催化剂的百公斤级规模化制备，完成基于单原子催化甲醇羰基化、乙炔氢氯化等技术的中试级放大与应用验证。创制 3-5 种新型单原子催化剂，实现重要化合物高位点选择性（选择性 > 20:1）和高对映选择性保持（ee > 98%）等特异性的氢氘交换，并实现 3-5 种具有临床研究价值的氘代药物公斤级制备。

关键词：单原子催化，羰基化反应，点选择性氙代反应，几何与电子性质调控，多尺度模拟。

经费说明：概算经费参考数约 3000 万元。

1.3 基于理论预测的单原子催化剂设计和制备

研究内容：针对复杂多相催化体系活性位点结构高度非均一、真实工况下动态演化难以精准描述、构效关系缺乏统一理论等关键科学问题，以单原子催化为核心，发展涵盖配位/第二以上壳层等外围环境调控、偕原子等局域原子结构精准催化体系的单原子催化理论框架。针对低碳烷烃 C-H 键活化、C-N/C-C 偶联、炔烃选择性加氢等典型反应体系，系统研究在不同催化模式（热、电、光）下，局域单原子电子结构、自旋态、配位环境及载体相互作用对催化性能的调控规律。重点揭示催化过程中活性中心由初始结构向亚稳态结构动态演化的微观机制，阐明结构演化与催化性能之间的动态构效关系，建立真实工况下活性中心结构、反应路径及催化性能之间的定量关联。发展结合第一性原理计算、机器学习力场方法与原位谱学/显微表征、动力学测试等实验协同的构效关系研究方法，揭示包含不同催化模式和典型反应的局域原子结构精准催化体系的构效关系，提炼催化活性域的“催化基因”，建立由单原子、偕原子等模型催化体系向复杂工业多相催化体系外推的构效关系解析平台，为复杂催化剂的理性设计提供理论基础。

考核指标：建立包含反应过程物种局域原子结构、电子结构及谱学信息的计算数据库不少于 1000 万条；发展结合第一性原理与机器学习力场的计算方法不少于 2 套，典型催化反应吸附能和反应能垒预测误差优于 0.10 eV；围绕热催化、电催化和光催化典型反应，建立覆盖单原子、偕原子等局域原子结构精准催化体系的理论模型不少于 4 类；建立催化活性域“催化基因”的定量构效关系模型不少于 12 套，其中涉及高能亚稳态结构演化及动态构效关系的模型不少于 6 套；通过原位/在线谱学、高分辨电子显微、动力学测试等实验手段完成不少于 3 个典型催化反应构效关系的验证；实现 1~2 类工业催化体系活性位点的定量解析，形成可指导复杂多相催化剂理性设计的理论方案。

关键词：单原子催化理论，局域原子结构精准催化体系，定量构效关系，催化基因，复杂多相催化剂理性设计。

经费说明：概算经费参考数约 2500 - 3000 万元。

1.4 多物理场协同驱动的催化界面微观模型与新反应体系构建

研究内容：针对外场作用下分子转化过程中催化界面动态演化、电荷与物种转移深度耦合，单一理论难以揭示界面调控机制等关键科学问题，研究光场、热场、电场、声场、磁场等多物理场协同作用下催化界面极化、载流子演化及界面微环境响应规律，揭示多场与催化剂及反应分子之间的耦

合规律，阐明其协同增强催化性能的微观原理，构建多物理场耦合作用下催化界面动态演化模型。以低值资源分子的战略高值转化为目标，协同多能量场构建特定催化界面微观环境，驱动低值资源分子化学键的靶向活化、精准断裂和高值产物化学键的高效形成，为多场作用下的高效能源催化转化过程提供理论基础。

考核指标：建立不少于 3 种多能量场耦合增强催化的定量理论模型，并能够指导反应器优化设计；在温和条件下实现不少于四个光基多能量场耦合增强的高效催化反应：氮气至硝酸根速率超过 $700\ \mu\text{mol/h/g}$ ，并探索出全新的催化耦合反应；甲烷至 C_n 产物 ($n \geq 2$) 选择性大于 90%，且稳定运行 200 小时的性能衰减小于 5%；水分子经多场耦合辅助太阳能直接分解制氢的紫外量子效率不低于 96%，在 50 小时的稳定运行时段内性能衰减不超过 5%，利用多场协同策略将可见光半导体光催化全解水的光响应范围拓展至 580 nm 以上；甘油至高值 C_3 液态产物选择性不低于 90%，并实现连续流式催化转化。

关键词：多能量场耦合，光热耦合催化，动态演化，增强催化，惰性分子活化。

经费说明：概算经费参考数约 3000 万元。

1.5 金属-载体强相互作用驱动的催化剂稳定性理论基础

研究内容：针对催化剂在复杂苛刻工况下易失活的挑战，

研究金属-载体强相互作用的稳定性调控机制。阐明金属-载体强相互作用影响金属熟化和迁移的物理本质，建立全生命周期的焓与熵驱动力、界面自由能变化与物种迁移势垒的量化方法，揭示多界面协同对高分散催化剂烧结动力学行为的调控规律；探索氧化和还原气氛对界面强相互作用的影响，研究高温下催化剂结构的动态重构和积碳行为，揭示界面限域与包覆、强锚定提升稳定性的微观机制。研究真实工况下催化剂的失活动力学，解析多重失活路径的竞争与耦合机制，构建人工智能辅助的多尺度计算与模拟框架，阐明复杂工况下多界面耦合强相互作用调控的失活触发条件与时空演化动力学特征。研究建立尺寸、温度、压力依赖的寿命预测模型，发展解耦催化活性与稳定性能跷跷板效应的高维设计方法，形成以金属-载体强相互作用为核心的跨尺度设计准则，为创制长寿命高效催化剂提供理论依据。

考核指标：建立 30 万级以上金属-载体界面作用强度与金属烧结行为的数据库，对界面能及扩散能垒的理论预测平均绝对误差 ≤ 0.15 eV，构建 ≥ 3 种高通用性的多界面作用描述符；建立 20 万级以上尺寸、反应温度、分压及载体可还原性对烧结和界面限域包覆数据库，阐明 ≥ 3 种典型载体的动态重构规律；揭示熟化、迁移碰撞、积碳、包覆、重构等 ≥ 5 种失活过程的触发机制和耦合规律；建立催化剂寿命预测模型和稳定性设计原则，预测并创制出涵盖高温（ $\geq 600^{\circ}\text{C}$ ）、

高分散、抗积炭、复杂工况气氛的新型高效稳定催化剂，针对干重整、合成氨、丙烷脱氢等反应，在工况下稳定运行 ≥ 1000 小时，催化活性衰减 $\leq 15\%$ ，活性金属尺寸长大率 $\leq 20\%$ 。

关键词：金属-载体强相互作用，界面动态重构，多重失活耦合机制，寿命预测模型，跨尺度稳定性设计。

经费说明：概算经费参考数约 3000 万元。

2. 催化过程动态解析

2.1 基于 X 射线自由电子激光技术的化学键动态调控

研究内容：研制 X 射线自由电子激光装置的多方法学表征平台，得到太赫兹光调控表面化学和催化反应的机制，实现强场太赫兹脉冲激发表面吸附分子的特定振动模式和反应路径的选择性调控。针对合成氨和甲烷选择性转化体系，在化学键本征的时空尺度直接测量反应过程中催化活性位的电子态、配位结构的动态演变，揭示强场太赫兹调控表界面化学键的微观机制，为发展高时空分辨的化学键调控和全新的高效催化体系提供科学依据。推动从传统静态机理分析向高维、非稳态、跨尺度、数据驱动的现代催化理论研究范式转变，为未来复杂催化体系的理论预测和可控设计提供方法基础。

考核指标：基于 X 射线自由电子激光装置，发展多种 X 射线泵浦探测技术，包括 X 射线吸收、发射、散射和光电子能谱技术，X 射线泵浦探测技术的时间分辨率优于 300 fs（光

子能量 540 eV, O 吸收边)。利用电子束团压缩与拍频纵向电子束调制, 获得中心频率在 5 – 50 THz 范围内和脉冲长度在 500 fs – 2 ps 内均连续可调的窄带强场太赫兹脉冲(全频段峰值场强 > 10 MV/cm, 且相对频谱带宽(FWHM) < 10%, 最高峰值场强可达 100 MV/cm), 选择性激发活性位振动、活性位-反应物相互作用以及吸附分子的低频运动, 驱动特定的化学反应路径。基于高精度从头算数据训练具有太赫兹响应的反应性机器学习势函数并开展模拟, 揭示太赫兹场驱动下的键长键角变化、能量转移过程及化学反应路径, 与实验形成理论-实验闭环。

关键词: X 射线自由电子激光, 泵浦探测, 强场太赫兹, 化学键调控。

经费说明: 概算经费参考数约 2800 万元。

2.2 等离子体耦合表界面催化过程的原子/分子尺度解析与调控机制

研究内容: 面向受热力学平衡、动力学及工况适应性限制的反应过程, 围绕水、氮气等难活化小分子以及制氢、加氢等典型催化反应, 发展适配非平衡等离子体反应条件的高效催化材料, 揭示外场作用下反应路径重构及选择性调控规律。发展适用于非平衡等离子体催化体系的原位动态表征技术, 建立自由基、激发态物种及气相活性氢等关键活性物种原位探测方法。发展催化剂活性位结构、电子结构及界面重

构的原位工况表征方法，建立催化剂结构-放电行为-活性物种-催化性能之间的动态构效关系，形成非平衡等离子体耦合催化剂理性设计、催化过程精准调控及催化性能优化的新理论、新方法，为外场强化催化体系的理性设计提供理论依据。

考核指标：建立等离子体催化原位动态表征方法，实现气相活性物种与界面反应过程同步解析。发展同步辐射分子束质谱原位表征技术，利用分子束快速采样和同步辐射 VUV 软电离，实现气相自由基和短寿命中间体的低碎裂、高选择性（电离能差 ≤ 0.1 eV）在线检测。发展双光子吸收激光诱导荧光光谱原位诊断技术，经标定实现 H、O、N 等关键原子自由基绝对浓度测量（检测限 $\leq 10^{13}$ cm⁻³）。建立适用于等离子体催化反应环境的 X 射线光电子能谱、共振俄歇电子能谱和 X 射线吸收谱等原位表征技术，实现非平衡等离子体条件下催化剂表面电子结构、化学态及局域原子配位结构的动态解析，其中电子能谱最高工作压力 ≥ 10 mbar，X 射线吸收谱最高工作压力 ≥ 1 bar，时间分辨率优于 0.1 s。形成 2-3 类典型非平衡等离子体催化剂设计方法，在等离子体活化 N₂ 与水、烃类直接合成高值含氮化学品反应中，N₂ 转化率 $\geq 5\%$ ，目标产物选择性 $\geq 90\%$ ，稳定运行时间 ≥ 200 小时；在等离子体催化含氢分子在线制氢反应中，产氢速率 ≥ 500 m³_{H₂} kg_{cat}⁻¹ h⁻¹，制氢能耗 ≤ 4.5 kWh·m⁻³_{H₂}。

关键词：等离子体催化，同步辐射原位表征，气相活性

物种，表界面活性中间体，催化剂动态重构。

经费说明：概算经费参考数约 2500 – 3000 万元。

2.3 跨越固液界面的人工光合成全时空成像表征研究

研究内容：面向人工光合作用光能向化学能高效转化的重大科学问题，聚焦光生电荷全过程演化，围绕固相电荷分离、固液界面电荷转移及液相催化反应等关键过程，破解制约人工光合作用效率提升的核心科学问题。研制人工光合作用全时空多模态测量平台，突破固相光生电荷超快演化、固液界面电荷转移及液相催化反应连续测量等关键技术，实现光吸收、电荷分离、界面传输与催化反应全过程贯通测量。发展电子结构、局域电场、双电层构型及反应中间体的多模态关联测量方法，在飞秒至秒、纳米尺度直接观测光生电荷与界面反应动态演化，构建人工光合作用全过程全时空图谱，推动催化研究由静态表征向全时空动态、真实固液界面原位测量新范式转变，为高效人工光合作用体系设计提供科学依据。

考核指标：建成人工光合作用全过程全时空多模态测量平台，实现固相-固液界面-液相全过程贯通测量。固相部分，实现飞秒至秒级连续时间分辨测量，在全过程时间范围内保持优于 20 nm 的空间分辨率，同步获取电子结构、电子态及光生电荷时空演化信息，实现光生电荷全过程连续追踪。固液界面部分，实现原位三维界面结构成像，面内空间分辨率

优于 50 nm、深度方向 (z) 优于 1 nm，同步获取局域电场、双电层结构及界面物质输运信息，实现电荷跨越固液界面的连续测量。液相部分，实现反应中间体及产物纳米尺度空间分布成像，空间分辨率优于 100 nm，实现催化反应动态过程连续观测。选取 2-3 类典型人工光合作用体系，开展全过程全时空测量，构建涵盖电子态、电荷输运、界面微环境、催化反应及产物生成的全过程全时空动态图谱，建立全过程全时空多模态测量技术体系。

关键词：人工光合作用，跨尺度成像，多维关联探测，固液界面，电荷与反应动态演化。

经费说明：概算经费参考数约 2500 - 3000 万元。

2.4 面向电化学器件中复杂界面的高时空分辨原位/工况谱学表征与动态调控

研究内容：针对电化学能源转化器件中气-液-固三相界面的复杂反应环境，建立和发展高时空分辨的原位/工况谱学（红外、拉曼）与显微学等表征技术，采取“时间分辨光谱-超高空间分辨成像-原子级电镜”多层次互补策略，开展跨时空尺度结构-功能信息的关联与交叉验证，深入解析原子-分子协同演化规律。在膜电极工业级电流密度下，实现对关键反应中间体、界面水分子、催化剂原子结构、界面微环境（pH、局域温度等）的实时同步监测，揭示其与宏观性能间的定量构效关系，重点剖析三相界面传质异质性特征与动态调控机

制。以 CO_2 还原与水氧化等碳循环导向型反应为模型，揭示传质-反应-结构耦合机制，为膜电极性能优化和长寿命催化剂设计提供核心实验表征手段和技术支撑。

考核指标：发展面向电化学器件中气-液-固三相界面的原位/工况红外光谱表征方法，实现关键反应中间体高时间分辨检测（ $\leq 1 \text{ ms}$ ）；在高空间分辨（ $\leq 10 \text{ nm}$ ）下开展电化学原位多模态测量（红外光谱、粘度、模量等）；于工业级电流密度（ $\geq 1000 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ ）探测反应中间体。开发原位/工况空间分辨拉曼光谱表征方法，实现界面电场等外场的埃级空间分辨（ $< 1 \text{ nm}$ ）及界面水纳米级分布解析（ $\leq 10 \text{ nm}$ ）；在工业级电流密度下解析气体扩散层与催化剂层物种分布（空间分辨率优于 $5 \text{ }\mu\text{m}$ ），并实现三相界面 100 nm 范围内局域 pH 定量检测（ $\leq \pm 0.5 \text{ pH}$ 单位）。建立高分辨电镜原位表征方法，实现液相环境中催化剂原子级实时成像（空间分辨率优于 0.20 nm ）；精准测定不同反应条件下三维原子结构及其坐标动态演化（坐标测量精度优于 15 pm ）。针对不少于 2 种三相界面重要电催化反应，在工况下获取中间体动态演化、空间分布与催化剂结构演变的多尺度数据，揭示三相界面构效关系。

关键词：气-液-固三相界面，原位/工况振动光谱，空间分辨振动光谱，界面动态结构演化，原位高分辨电镜，催化剂结构演化。

经费说明：概算经费参考数约 2500 – 3000 万元。

2.5 催化振荡行为的实空间成像与机理研究

研究内容：面向催化振荡等非平衡动态催化过程微观机理难以实时解析的重大需求，催化振荡广泛存在于费托合成、甲烷干重整等重要工业催化过程中，其非平衡动态行为直接影响催化反应活性和产物选择性，是突破传统稳态催化性能极限、发展动态催化理论和优化重大催化工业过程的重要科学基础。针对真实工况下催化振荡过程跨尺度、多物理场同步观测能力不足这一关键技术瓶颈，研发多模态跨尺度原位动态成像及反应过程谱学表征技术体系，构建覆盖表面敏感的原子、纳米、介观及宏观尺度的催化振荡全过程动态观测方法。研发原位扫描电子显微镜、透射电子显微镜、近常压光电子能谱、原位扫描隧道显微镜、在线拉曼光谱、在线扫描质谱及微区热分析等多技术同步关联、动态配准与数据融合关键技术，突破催化振荡过程中表面结构演化、化学态变化、局域温度场、物质流输运及催化性能同步实时测量等关键核心技术。通过多模态原位表征技术的协同融合，弥合催化反应研究中的材料鸿沟、压力鸿沟和尺度鸿沟，建立催化振荡行为与表面微结构、化学状态、传热传质、催化反应活性及产物选择性之间的跨尺度映射关系，揭示非平衡动态行为调控催化活性和反应选择性的作用机制，实现催化振荡行为的实空间原位动态成像、非平衡机理解析及主动调控，为

高活性、高选择性催化剂设计及动态催化过程优化提供理论基础和技术支撑。构建催化振荡“图-谱-热-效”多模态数据库，发展实验数据驱动与第一性原理、微观动力学相融合的人工智能模拟新方法，建立催化振荡非平衡动力学理论模型，实现多模态实验数据、理论计算与人工智能预测的协同优化，支撑动态催化过程智能解析、机理发现及催化剂智能设计。

考核指标：围绕催化振荡行为的原位动态成像与跨尺度机理解析，研发覆盖“原位动态成像-多模态同步表征-智能融合分析-主动调控”的催化振荡原位动态观测平台，实现原位电子显微、原位谱学及热分析等不少于 5 种原位表征技术同步关联，工作压力可达 10000 Pa，探测温度可达 1000 °C，表面吸附分子探测灵敏度达 0.05 ML；实现原子尺度至毫米尺度动态信息跨尺度关联，动态同步时间分辨率优于 10 ms；实现原位微型差示扫描量热与热重分析同原位电镜同工况联用，比热流分辨率优于 $0.1 \text{ W} \cdot \text{g}^{-1}$ ，质量变化检测精度优于 $0.1 \mu\text{g}$ ；实现催化剂表面结构、化学态、微区热动力学行为、质量变化及反应产物同步实时测量；建立催化振荡动态行为自动识别与时空演化分析方法，振荡行为识别准确率 $\geq 90\%$ ，多模态数据自动配准精度 $\leq 10 \text{ nm}$ ；实现催化剂表面动态演化原子级成像，分辨率 $\leq 0.3 \text{ nm}$ ；建立覆盖不少于 10 种典型催化反应体系的催化振荡数据库，包含动态图像、谱学、热动力学、质量变化及催化性能等多模态数据条目 ≥ 50000 条；建立催化

振荡行为与催化性能跨尺度映射模型，构建不少于 3 种典型体系的非平衡态理论模型，理论与实验特征匹配率 $\geq 85\%$ ；开发多模态数据融合与人工智能辅助机理解析方法，实现催化振荡特征识别、演化路径预测及关键控制参量提取，振荡状态识别准确率 $\geq 90\%$ ，典型体系演化趋势预测准确率 $\geq 85\%$ ；完成不少于 3 种典型催化体系振荡行为的智能解析与主动调控验证；突破真实工况下催化振荡非平衡动态过程跨尺度同步原位观测关键技术，形成国际领先的催化振荡动态表征与智能解析平台。

关键词：催化振荡，原位动态成像和谱学表征，跨尺度关联的非平衡催化，动态图谱数据库。

经费说明：概算经费参考数约 2500 - 3000 万元。

2.6 催化微结构智能透射电镜显微研究

研究内容：面向催化智能研究范式变革对高通量、高精度微结构数据获取的迫切需求，摆脱传统透射显微分析长期依赖人工所导致的效率瓶颈与主观偏差，研发智能透射电子显微镜系统与解析方法，实现催化剂结构数据的自动化、高通量采集与分析流程自主规划。突破覆盖“制样传样-数据采集-结构解析”全流程的无人化智能透射显微表征关键核心技术，包括：样品标准化制备与自动传递进样，智能电子成像光路调节与样品精准定位，基于图像结构智能识别与特征跟踪的实时机器视觉，图像-谱学-衍射等同源多模态数据的自主

采集与智能解析，具身智能自主决策。联合同源样品合成与性能评价标准数据，建立催化“图-谱-效”多模态数据库，搭建催化微结构与性能关联模型，支撑构效规律发现并指导催化剂迭代优化。建立兼顾高通量、高精度、可定量、与性能关联的催化微结构智能透射电镜显微研究新范式。

考核指标：围绕高精度催化微结构数据的高通量获取与智能解析，研发覆盖“制样传样-数据采集-结构解析”全流程的智能透射电镜系统与分析方法，实现 24 小时无人值守自主成像分析，连续运行时长 ≥ 72 小时；智能成像分析通量 ≥ 500 样品/天，自动采集图像 ≥ 10000 张/天；同源样品电镜制样一致性 $\geq 90\%$ ；开发显微机器视觉，实现电子光路自主调节与样品区域自主选择，目标识别准确率 $\geq 90\%$ ，定位精度 ≤ 10 nm，结构识别与分割平均精度均值 ≥ 0.8 ；实现图像-谱学-衍射等同源异构数据的自主采集，同源点位对准精度 ≤ 5 nm；开发反应工况催化微结构原位电镜数据采集、分析与质量评价智能方法，温度从室温至 ≥ 600 °C 可调，动态图像分辨率 ≤ 0.08 nm，能量分辨率 ≤ 0.3 eV，时间分辨率 ≤ 0.1 s；构建催化剂“图-谱-效”多模态数据库，覆盖 ≥ 20 种催化剂类型，包含数据条目 ≥ 50000 条，支撑构效规律发现并反馈指导催化剂优化。

关键词：催化剂结构高通量表征，智能透射电镜，机器视觉分析，电子光学自主调节，图像-谱学-衍射同源数据采集。

经费说明：概算经费参考数约 3000 万元。

3. 人工智能驱动的催化剂精准设计与制备

3.1 面向限域催化体系原位动态模拟方法和智能设计策略

研究内容：面向催化科学从“经验试错”向理性设计转型的重大需求，重点针对化石能源与可再生能源高效转化中典型反应存在的活性位作用机制不明、构效关系认知依赖经验、催化反应效率低、传统试错研发周期长等关键科学问题，融合量子化学与人工智能技术开展催化剂精准设计研究。构建多体系高精度数据库与物理可解释描述符，发展 DFT 级精度通用机器学习势函数；建立多维度动态描述符体系，实现工况条件下界面动态演化与多物理场耦合模拟。结合面向分子筛材料等限域催化体系的通用机器学习势函数和人工智能预测模型，搜索不同合成配方与反应条件下的活性中心结构，快速评估催化性能，解析分子筛拓扑结构、电子结构与反应性能之间的内在关联，构建面向活性中心筛选与催化剂设计的智能化方法，为分子筛催化材料精准构筑及烯烃高值化转化、生物基芳烃合成等工业相关过程提供理论基础和方法支撑。

考核指标：针对典型反应体系，实现复杂催化表界面的百纳秒级高效计算；构建可覆盖多种材料体系（元素 15 种以上，反应体系 10000 种以上）的标准化高精度数据方法与通

用势函数 (DFT 计算数据 100 万条以上); 建立不少于 5 种物理可解释的多维度动态描述符, 势函数能量误差 10 meV/atom 以内, 力误差 100 meV/Å 以内; 搭建催化剂精准设计智算与数据平台, 适配高温高压极端工况与多物理场耦合仿真, 构建系统覆盖金属、氧化物、多孔材料等在催化反应空间中的高精度数据集, 催化材料设计智能体模型预测精度 $\leq \pm 8\%$ 以及优化多元活性位点结构的迭代效率 ≤ 10 轮; 烯烃骨架构型转换反应产物时空收率 $\geq 25 \text{ mmol g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ h}^{-1}$, 选择性 $\geq 92\%$ 。以分子氧为氧化剂的烃类选择氧化反应中, 环氧化产物的时空收率 $\geq 10 \text{ mmol g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ h}^{-1}$; 乙烯与 2,5-二甲基呋喃 (DMF) 制对二甲苯反应的时空收率 $\geq 0.15 \text{ mmol g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ h}^{-1}$ (DMF 浓度 $\geq 20\%$), 选择性 $\geq 75\%$; 实现其中至少 2 种催化剂的吨级规模化放大, 以及至少 1 种催化剂的万吨级工业示范。

关键词: 催化剂精准设计, C-H/C-C 键活化, 机器学习势函数, 活性位调控, 动态构效关系, 限域催化。

经费说明: 概算经费参考数约 2500 万元。

3.2 团簇及二维催化材料精准构筑及规模化制备

研究内容: 低维催化材料通过将催化活性中心精准限域于原子或准原子尺度, 为实现催化反应分子级精细调控与性能跨越式提升提供了核心技术路径。围绕我国能源转化与绿色化工的重大战略需求, 针对低维催化材料活性中心原子级调控精度不足、亚稳态结构热力学稳定性差、团簇构效机制

认知不清、规模化制备均一性难以保障、传统研发依赖试错效率低下等核心挑战，融合量子化学、人工智能与精准合成技术，系统开展单原子、团簇、亚稳态二维材料等多类低维催化体系的理性设计与精准构筑研究。揭示限域环境与界面效应对 C-H/C-C 键活化、电催化氢能转化等反应的调控机制，发展工况下活性位动态演化的原位表征方法，突破低维材料规模化制备瓶颈，形成“理论设计-精准合成-性能验证-规模放大”的完整研发范式，为新一代高效稳定催化材料的工业化应用提供核心支撑。

考核指标：建立覆盖 30 种以上 d 区金属及关键元素的低维催化体系通用高精度机器学习势函数 1 套，能量预测值与气相、凝聚相实验数据误差 ≤ 3 kcal/mol；开发团簇全局结构优化、亚稳态二维相预测的 AI 驱动模型 ≥ 2 套，构建包含 $\geq 10^8$ 个条目的金属团簇结构-反应性能数据库，覆盖 3 - 20 个原子尺寸区间并实现开放共享；建成低维催化材料多目标逆向设计平台 1 套，设计效率较传统试错提升 100 倍以上。发展原子精确团簇合成、单原子缺陷锚定、亚稳态二维材料可控生长等精准制备新方法 ≥ 4 类，制备原子数精确非贵金属团簇催化剂 ≥ 5 类、高均一性亚稳态金属基二维材料 ≥ 5 种；团簇原子数控制偏差 $\leq \pm 1$ ，单原子负载均一性偏差 $\leq 10\%$ ，二维材料相纯度 $\geq 95\%$ 。突破亚稳态金属基二维材料规模化制备瓶颈，实现公斤级批量制备，材料关键结构参数与催化性

能均一性偏差 $\leq 10\%$ 。完成电解水制氢与氢空燃料电池器件验证，电解水器件稳定运行 $\geq 2000 \text{ h}@3\text{A}/\text{cm}^2$ ，衰减率 $\leq 15 \mu\text{V}/\text{h}$ （阳极铱负载量 $\leq 0.2 \text{ mg}/\text{cm}^2$ ），氢空燃料电池功率密度 $\geq 1.4 \text{ W}/\text{cm}^2$ ，运行 $\geq 1000 \text{ h}$ 衰减率 $\leq 3\%$ （阴极铂负载量 $\leq 0.1 \text{ mg}/\text{cm}^2$ ）。

关键词：二维催化材料，金属团簇，精准构筑，逆向设计，电催化氢能，单原子催化。

经费说明：概算经费参考数约 2500 万元。

3.3 高效纳米酶催化反应体系的精准构筑及其催化原理的定量阐述

研究内容：针对木质纤维素生物质降解及高值化利用中高温多相催化易诱发缩合副反应、天然酶稳定性差等瓶颈问题，研究兼具类天然酶低温催化高活性与多相催化剂高稳定性的纳米酶，定量阐述催化原理。建设高质量纳米酶合成、结构和催化性能数据库，研究贯穿“活性中心设计—合成路径模拟—催化原理解析”的全链条人工智能算法，与实验结合，研究理论预测高活性纳米酶结构的精准构筑。研究固体催化剂表面位分布的定量表征方法和活性位分辨催化反应动力学的表征方法，定量研究纳米酶催化原理和构效关系。研究纳米酶低温高效稳定催化反应新体系的规模化放大。

考核指标：发展 1 套多势能面协同优化算法和 1 个原位红外光谱解谱智能体，预测 ≥ 3 种高活性纳米酶结构的合成路

径和准确解析 ≥ 3 种高活性纳米酶结构。建设 ≥ 200 种纳米酶的材料合成和结构数据库，形成标准化纳米酶催化反应性能/反应动力学数据 ≥ 600 条的纳米酶催化性能数据库；发展 ≥ 3 个低温域纳米酶催化木质纤维素解聚及高值化转化新反应体系，在 $-20 - 100^{\circ}\text{C}$ 范围保持 $\geq 70\%$ 最优条件催化活性的催化活性，在与化学催化氧化法相同转化率下缩合副反应指标（如木质素分子量分布、 $\beta\text{-O-4}$ 保留率、S/G 比等）显著降低，常温工作 14 天残余活性 $\geq 80\%$ 且高于对照天然酶；完成 ≥ 1 种代表性高活性纳米酶的公斤级制备，在 $\geq 20\text{ L}$ 反应釜中完成 $\geq 1\text{ kg}$ 秸秆/批次的规模化性能评价，纳米酶/秸秆质量比 $\leq 1:500$ 。发展出适用于纳米酶表面位分布（分辨率： mol 表面位/克催化剂）和活性位分辨反应动力学的定量研究方法学，定量阐述 ≥ 3 类纳米酶低温催化木质纤维素生物质降解及高值化利用反应体系的构效关系。

关键词：纳米酶，人工智能，木质纤维素解聚及高值化转化，表面位分布，活性位分辨反应动力学。

经费说明：概算经费参考数约 2500 万元。

3.4 催化原位表征多模态关联与机制推理模型构建

研究内容：针对催化原位表征数据规模不足，多模态证据难以在样品、反应条件和时间尺度上对齐互证，构效关系与机制假说难以跨体系复用等问题，研究以原位表征为核心的多模态数据表示、证据链建模与机制推理方法。面向典型

催化界面与反应过程，围绕催化剂结构、表面物种和催化性能指标，重点研究原位振动光谱、X 射线吸收、紫外可见、在线质谱/色谱、同位素或瞬态实验、阻抗与动力学实验等多模态数据。建立自动化或半自动化实验与电子实验记录本相联动的数据采集流程，规范记录样品制备、反应条件、原位表征、性能、理论计算和文献信息，形成可追溯的训练数据。构建催化剂原位谱学数据库，以及“体系-条件-表征-性能-机制”证据链。发展融合催化物理化学约束、跨模态表示对齐、关联规律发现与不确定性评估的机制推理模型，挖掘可迁移描述符、经验构效关系和可验证的机制假说。选择水分解、氧还原、氮还原、二氧化碳还原等催化体系开展验证，构建数据生产、模型推理与知识更新的闭环。

考核指标：建立 1 套原位表征数据采集与电子实验记录本联动流程，实现原始数据、元数据和处理过程的同步归档；建立 1 套覆盖原位谱学、在线产物分析、动力学测试和理论计算的多模态数据治理规范；开发一套全自动计算智能体工作流，实现从“结构搜索-动力学模拟-谱学计算”的全流程闭环；建成不少于 3 类典型催化剂原位谱学数据集，原始实验记录不少于 10000 条，形成不少于 1000 组高质量关联样本；构建 1 个催化机制推理模型；在不少于 3 类体系中形成不少于 10 个可迁移描述符或关联规则；集成 ≥ 3 种原位/工况表征手段，实现反应信号智能触发表征，触发延迟 ≤ 100 ms，关键动态

过程时间分辨优于 10 ms；在线评价单次测试 ≤ 15 min，表征通量 ≥ 40 样品/天，针对 ≥ 2 类催化反应自主迭代优化，每类反应迭代 ≥ 10 轮，综合性能较人工经验基线提升 $\geq 30\%$ 。发展氮气无氨化合成路线，建立从氮气直接构建高附加值含氮产品的新工艺。

关键词：原位表征，谱学电化学，电子实验记录本，催化剂原位表征数据库，证据链建模，机制推理模型。

经费说明：概算经费参考数约 2500 万元。

3.5 人工智能驱动轻质烷烃催化转化智能研发方法框架

研究内容：针对轻质烷烃热催化转化制高值多碳含氧化合物过程中 C-H 键活化困难、C-C 偶联选择性低及催化剂研发效率低等关键问题，发展人工智能驱动的催化剂智能研发方法。构建面向轻质烷烃催化转化的领域知识图谱，建立融合催化机理、实验数据与理论计算的智能设计方法，实现包括分子筛限域二维材料在内的催化剂高效筛选与精准设计。建立基于物理与化学规则的人工智能催化推理引擎，支撑大语言模型和具身异构智能体驱动的催化实验与计算任务的自动分解与路径规划。建立自动化高通量催化剂制备、表征和性能评价平台。揭示分子筛二维材料催化剂的活性位结构、孔道限域效应与 C-C 偶联反应协同机制，创制甲烷低温高效转化制多碳含氧化合物等新型催化剂。

考核指标：构建智能化文献收集、处理、分析工作流，

完成非均相催化领域知识图谱 1 套，催化剂搜索规模 ≥ 10 万种；建成 AI 辅助的自动化高通量催化剂研发平台 1 套，涵盖催化剂设计、制备、表征及性能评价的全链条能力，单周催化剂筛选能力 ≥ 1000 种；阐明分子筛限域二维材料中活性位结构、孔道限域效应与 C-C 偶联协同强化机制，建立催化剂构效关系模型；创制 3-5 种甲烷低温高效转化制多碳含氧化合物催化剂，在 $\leq 200\text{ }^{\circ}\text{C}$ 下，实现 C-C 偶联产物选择性 $\geq 80\%$ ，目标产物生成速率 $\geq 1\text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ 。针对轻质烷烃脱氢制烯烃反应，烯烃选择性 $\geq 96\%$ ，贵金属用量 $\leq 0.3\text{ wt}\%$ ，催化剂稳定性 ≥ 2000 小时，反应 TOF 较传统催化剂提升 30% 以上。

关键词：人工智能驱动，催化剂创制，碳氢活化，碳碳偶联，分子筛限域二维材料。

经费说明：概算经费参考数约 2500 万元。

4. 可再生能源与化石资源的催化耦合利用

4.1 可再生电力驱动的碳氢资源低温耦合转化与中试验证

研究内容：基于可再生电力驱动的烯烃和合成气低温耦合转化的关键催化材料及催化过程研究。发展可再生电力驱动的烯烃和合成气低温耦合转化的催化新材料和多相催化反应新工艺，研究催化剂活性位点微环境与多相羰基化反应相匹配技术以及活性位点与碳基底物分子的成键-断键机制，发展可再生电力驱动的碳氢资源定向高效耦合的催化新材料、

含氧中间物低温可控加氢的催化新材料；结合电加热等直接电驱动供热技术，实现反应器层面的能效与催化中间体精准调控，突破传统外部供热与传质局限；研究短流程低能耗的多相羰基化反应工艺，结合催化新材料宏量制备技术，开发烯烃和合成气低温耦合转化制高值含氧化学品的多相催化新技术，完成千吨级可再生电力驱动的碳氢资源低温耦合转化的中试验证。

考核指标：基于可再生电力驱动的烯烃和合成气低温耦合转化，研制高活性和高选择性的烯烃氢甲酰化多相催化剂，形成规模化多相氢甲酰化催化剂吨级宏量制备技术。结合此技术，利用现有石油炼化副产混合烃，经氢甲酰化及其加氢制备对应醇类，其中：氢甲酰化单元，烯烃单程转化率 > 80%，总醛选择性 > 70%，催化剂寿命 > 2000 小时；加氢单元，醛单程转化率 > 95%，醇选择性 > 90%，催化剂寿命 > 2000 小时。通过引入可再生电力驱动的电加热催化过程，对比传统高温热催化工艺，实现系统综合能耗降低 10% 以上。完成千吨级可再生电力驱动的烯烃、合成气与氢气经多相氢甲酰化及加氢制醇中试验证。

关键词：可再生电力驱动，合成气转化，烯烃转化，多相羰基化，千吨级中试。

经费说明：概算经费参考数约 3000 - 4000 万元。

4.2 生物质平台分子与绿氢耦合制可持续航空燃料

研究内容：面向可再生能源高效利用和生物质资源低碳转化需求，突破传统热驱动生物质制航空燃料技术范式，构建可再生能源驱动的绿氢与生物质平台中间体耦合制可持续航空燃料新体系。围绕糠醛类、低碳醇、木质素衍生酚类及生物基合成气等典型生物质平台中间体，发展电催化、光电催化等可再生能源驱动绿氢制备新技术，建立绿氢供给与催化转化协同调控新路径，实现可再生能源向可持续航空燃料的高效转化。针对波动性绿电直连电解水制氢与生物质催化转化耦合过程，研发具备快速响应特性的高活性、高稳定、宽负荷抗波动的电催化体系，阐明绿电直连波动工况下催化剂结构演变和活性氢生成机制，揭示绿氢供给、氢碳比调控与催化反应协同演化规律，建立可再生能源驱动绿氢供给与生物质平台中间体高效转化的新体系。研究多场耦合条件下生物质平台中间体与绿氢协同催化转化机制，重点阐明表面活性物种生成与迁移行为、加氢脱氧、C-C 偶联及链增长规律，通过原位动态表征技术研究上述过程对多场耦合催化反应路径和动力学的调控规律。开展生物质气化、生物低碳醇转化、绿氢供给、生物基合成气调控及可持续航空燃料合成系统的协同管理与集成工艺研究，形成万吨级生物质平台中间体与绿氢耦合制可持续航空燃料系统工艺包并开展经济性分析，推动应用示范。

考核指标：发展可再生能源驱动的生物质平台分子偶联

技术（糠醛类、低碳醇、木质素衍生酚类或生物基合成气）， C_{8+} 选择性 $\geq 95\%$ ，单程转化率 $\geq 50\%$ 。开发低贵金属电解水催化材料，贵金属总载量 $\leq 0.6 \text{ mg/cm}^2$ ，单池电压 $\leq 1.70 \text{ V}@4 \text{ A/cm}^2$ ；绿电直连工况下在 $5\% \sim 300\%$ 功率波动下稳定运行。开发多场串联的生物质原料与波动绿氢耦合制航空燃料催化反应体系，实现可持续航空燃料组分选择性 $\geq 60\%$ ；建立多场耦合下生物质转化制可持续航空燃料系统集成验证平台，生物质碳转化率不低于 95% ，合成可持续航油反应器万吨级产能，装置负荷可调区间 $40\% \sim 110\%$ 。形成十万吨级生物质转化制可持续航空燃料系统工艺包。

关键词：可再生能源，电驱动，多场耦合，生物质平台分子，绿氢，可持续航空燃料。

经费说明：概算经费参考数约 3000 万元。

4.3 绿电辅助的化石资源惰性键温和活化与定向转化

研究内容：面向传统化工高能耗、高排放及选择性差等难题，发展绿电驱动的化学品制造技术，是实现新能源非电利用与化石资源低碳化、高值化利用的关键。聚焦甲烷、甲醇、 CO_2 等化石资源关键 C1 分子电催化转化制高值化学品，需解决 C-H、C-O 惰性键活化及 C-C、C-N 键精准构筑等催化难题。构建“C1→大宗→精细化学品”增值链，发展惰性键温和活化与成键新方法。结合 AI 驱动电化学界面计算，构建催化知识图谱与路径推荐系统；发展可再生电力驱动新体系，

探索阳极-阴极协同、交变电场调控等耦合策略，揭示电场及微环境调控化学键转化规律。实现 C1 分子高选择性制乙烯、乙二醇等 C₂₊产物，并开拓烯烃、芳烃、醇等电驱动制己二腈、手性氨基酸等高值化学品新路径。针对绿电波动性挑战，建立催化体系与反应器协同优化技术，发展柔性催化、模块化连续流电化学制造及自适应调控，完成典型产品中试验证。

考核指标：创制高效高选择性电催化剂，甲烷、甲醇、CO₂等 C1 分子制乙烯、乙二醇等 C₂₊产物选择性 ≥ 80%，建立催化剂表面结构与 C1 分子活化和 C-C 偶联的控制规律；发展 AI 支撑的电催化界面模拟方法，构建 C1 分子活化的催化知识图谱和智能路径推荐系统，抽提键活化关键因素，推荐新路径；建立烯烃、芳烃、醇等绿电驱动高值转化制己二腈、手性氨基酸等反应体系，产物选择性和法拉第效率 ≥ 80%，其中手性产物对映选择性 ≥ 90% ee；建立适应波动性绿电的催化体系与反应器协同优化技术，实现自适应控制、微秒至秒级原位检测及秒级启停；开发 1-2 套连续流电催化制造技术及装备，完成己二腈等 1-2 种典型高值化学品 100 吨/年连续化中试验证，法拉第效率 ≥ 80%、吨产品绿电消耗及碳排放较传统路线显著降低（CO₂减排 ≥ 40%）。

关键词：惰性键活化，碳-碳/碳-氮偶联，C₂₊化合物，大宗/精细化学品。

经费说明：概算经费参考数约 2500 - 3000 万元。

4.4 电解水余热驱动化石资源催化转化

研究内容：聚焦电解水制氢过程所产余热与氢气的协同利用，针对余热品位低但排放量大、传统化石资源催化转化过程能耗高、全系统能效低等问题，开发基于电解水余热驱动的 CO₂ 低温加氢制甲醇和乙炔低温加氢制乙烯两个催化转化新过程，以及与之匹配的低温高效加氢催化剂。在能量利用层面，实现余热对反应物预热、反应温度维持等关键用热环节的精准供给与系统能效提升；在物质利用层面，实现电解水产出 H₂ 向加氢反应过程的直接供给，减少中间 H₂ 储运环节。建立全流程能量流与物质流匹配优化方法，开展中试验证，发展基于电解水余热与产氢协同利用的“电-热-氢-碳”协同转化新概念与新技术。

考核指标：电解水制氢电解槽直流能耗 $\leq 4.1 \text{ kWh/Nm}^3 \text{ H}_2$ ，电解水单元出口氢气压力 0 – 35 MPa 可调。开发 CO₂ 低温加氢制甲醇、乙炔低温加氢制乙烯高效催化剂。建立 100 kW 级电解水制氢-化石资源催化转化耦合中试装置，基于该装置与催化剂，在仅利用电解水余热供热、无需外部供热的条件下，实现两类热催化转化过程：CO₂ 低温加氢制甲醇过程，CO₂ 单程转化率 $\geq 20\%$ ，甲醇选择性 $\geq 90\%$ ；乙炔低温加氢制乙烯过程，乙炔单程转化率 $\geq 90\%$ ，乙烯选择性 $\geq 90\%$ 。完成 1000 小时连续运行验证，性能衰减 $\leq 10\%$ 。实现电-热高效耦合，电解水余热回收利用率 $\geq 70\%$ ，电能综合利用率提

高 10%以上。

关键词：电解水制氢，余热利用，CO₂ 低温加氢制甲醇、乙炔低温加氢制乙烯，“电-热-氢-碳”协同转化。

经费说明：概算经费参考数约 3500 万元。

5. 资源多样化的催化循环利用新过程

5.1 温和条件下 CO₂ 催化转化制 C₂₊含氧化合物

研究内容：针对 CO₂ 催化转化过程中的化学键断裂和重构及碳-碳键形成、CO/CO₂ 插入过程的精准控制等关键问题，构建结构精确的催化活性中心与协同催化新体系，发展温和条件下热/光/电等能量驱动的 CO₂ 催化合成 C₂₊含氧化合物（碳链长度 ≥ 2 的醇、羧酸、酯等）新过程，阐明多尺度活性基元之间的界面相互作用机制及其在反应物传输、能质传递调控中的协同效应，实现 CO₂ 高效活化与定向碳-碳偶联制 C₂₊含氧化合物。探索实际烟气中低浓度 CO₂ 条件下的催化效率及抗中毒机制。完成催化剂规模化制备，结合百吨级中试技术与经济性验证，形成可工业应用的 CO₂ 制 C₂₊含氧化合物新催化体系和新技术。

考核指标：揭示 CO₂ 分子化学键断裂与重构、碳-碳键形成与链增长等过程规律，全面阐述催化剂构效关系与催化机制。开发 3 种不同能量驱动的 CO₂ 直接催化转化制 C₂₊含氧化合物（醇、羧酸、酯等）的新催化体系和新过程，有机产物中 C₂₊含氧化合物选择性 ≥ 90%。在热催化体系中，反应温

度 $\leq 300^{\circ}\text{C}$ ， CO_2 单程转化率 $\geq 25\%$ ，时空收率 $\geq 200 \text{ mg/g/h}$ ，稳定运行 ≥ 1000 小时；在光催化体系中，表观量子效率 $\geq 10\%$ ，稳定运行 ≥ 300 小时；在电催化体系中，在 $\geq 1 \text{ A/cm}^2$ 电流密度条件下 C_{2+} 含氧化合物产物法拉第效率 $\geq 60\%$ ，稳定运行 ≥ 300 小时。建设适用机理研究、工业规模验证、可用于放大规模的催化剂和工艺匹配的反应装置；完成 1-2 种催化剂百公斤级放大制备；完成百吨级/年中试验证和 72 小时连续稳定运行考核，编制万吨/年产量规模工艺包。

关键词：二氧化碳，催化转化，碳-碳偶联， C_{2+} 含氧化合物。

经费说明：概算经费参考数 2500 - 3000 万元。

5.2 混合废塑料化学解聚与分级加氢制航空煤油和高值化学品

研究内容：针对混合废塑料原料组分复杂、杂质干扰严重、催化剂易失活、产物选择性难以精准调控等关键科学问题，以混合废塑料为研究对象，发展化学解聚与分级加氢制油品和化学品的新机制与新策略。系统考察混合废塑料中聚合物组成、添加剂、残留金属等杂质对反应过程的影响规律；面向复杂混合废塑料，研发高效除杂、除氯预处理技术；研制高活性、高选择性、抗中毒、抗组分变化的催化剂及级联催化体系，实现航空煤油和醇、酯、酸类高值化学品的高选择性制备；为混合废塑料的高值化学回收提供技术支撑。

考核指标：开发 4 - 6 种混合废塑料高效催化降解/解聚新体系，实现航空煤油和醇、酯、酸类高值化学品的高选择性制备。发展混合废塑料温和条件解聚与分级加氢方法，开发连续流动加氢工艺，反应温度 $\leq 300^{\circ}\text{C}$ 、氢气压力 $\leq 6\text{ Mpa}$ ；醇、酯、酸类高值化学品收率 $\geq 70\%$ ，纯度 $\geq 99\%$ ；航空煤油实现千吨级/年中试示范，连续运行 72 小时，收率 $\geq 70\%$ ，馏分净燃烧热值 $\geq 42.8\text{ MJ/kg}$ 、冰点 $\leq -47^{\circ}\text{C}$ 、闭口闪点 $\geq 38^{\circ}\text{C}$ ，硫醇硫 $\leq 0.0020\%$ 。针对聚氯乙烯组分实现碳资源定向转化，碳利用率 $\geq 70\%$ 。混合废塑料中氯含量脱除率 $\geq 95\%$ ，产品中氯含量 $\leq 100\text{ ppm}$ 。针对混合废塑料高效催化降解新体系及反应过程编制万吨级工艺包。

关键词：混合废塑料，航空煤油，高值化学品，化学解聚，分级加氢。

经费说明：概算经费参考数 2500 - 3000 万元。

5.3 含氧废塑料的 C-S/C-N 新反应体系构建与高附加值化学品合成

研究内容：针对聚酯、聚氨酯、聚酰胺等含氧废塑料转化利用制二腈、二胺、酰胺、硫醚、砜等高附加值化学品，发展多功能催化体系及热、光、电催化或协同催化转化策略，实现 C-C、C-O 键的可控断裂以及 C-N、C-S 键的精准构建，发展由废塑料制备含氮、含硫高值化学品的新路线、新方法，揭示催化反应机制与宏观调控规律；优化反应工艺，建立废

弃塑料转化制备高值化学品新技术，为由废弃塑料生产含氮、含硫产品产业发展提供技术支撑。

考核指标：开发不少于 3 种热、光、电催化体系，实现温和条件下（温度 $\leq 200^{\circ}\text{C}$ ）废塑料转化制备含氮、含硫高值化学品，阐明废塑料降解反应路径与关键中间体生成及转化机制；建立 2-3 种含氧废弃塑料可控降解构建 C-N、C-S 键的新策略，实现目标产物收率 $\geq 90\%$ ，纯度 $\geq 99\%$ ；开发至少 1 种吨级规模的热、光、电催化装置，验证真实废弃塑料转化制化学品工艺，连续运行不少于 100 小时。

关键词：废塑料转化，高值化学品，惰性键断键，C-N 偶联，C-S 偶联，热/光/电催化。

经费说明：概算经费参考数 2500 - 3000 万元。

5.4 生物油加氢制芳烃、环烷烃与异构烷烃技术

研究内容：针对生物油组分复杂、含氧量高、稳定性差，杂质易导致催化剂中毒，传统方法脱氧提质难、产物选择性、燃烧性能差等难题。研发面向酚类、脂肪酸（酯）等复杂组分转化的高效、高稳定性多功能催化剂，揭示催化剂中活性位、形貌结构与 C-O/C-C 键选择性活化重构的构效关系，探明不同脱氧反应路径的选择性调控机制，以及催化剂水热稳定性影响规律，开发高效、高选择性催化加氢脱氧反应体系；设计研制高选择性加氢异构专用分子筛，建立加氢异构专用分子筛高效合成方法，揭示多相粘性体系的混合-传质-晶化-

性能的影响规律。建立芳烃、环烷烃、异构烃等高性能烃类燃料组分选择性催化制备工艺，并实现工业示范应用。

考核指标：开发不少于 2 种具有高活性、高稳定性的廉价金属加氢脱氧催化剂，生物油脱氧率 $\geq 90\%$ ，生物油中酚类化合物脱氧制芳烃、环烷烃选择性 $\geq 90\%$ ，催化剂寿命 ≥ 200 小时；建立 1-2 种油分级稳定化与深度脱氧耦合工艺，形成 1 套生物油定向制备芳烃和环烷烃的连续化催化转化技术路线；开发新一代加氢异构催化剂，实现 $\leq 330^\circ\text{C}$ 下生物油加氢异构，C8-C18 烷烃异构化率 $\geq 90\%$ ；完成核心催化剂吨级放大及工业生产，实现万吨级/年生物油加氢异构催化工业示范应用，航油段正异构混合烷烃收率 $\geq 90\%$ ，性能满足 ASTM D7566 或 GB 6537 中的 HEFA-SPK 指标要求。

关键词：生物油，加氢脱氧，加氢异构，芳烃，环烷烃，异构烷烃。

经费说明：概算经费参考数 2500 - 3000 万元。

5.5 碳基资源定向转化制备关键芳香化学品万吨级工业示范

研究内容：针对化石碳基资源及其衍生分子的高效清洁化利用，开展对甲基乙苯、对二异丙基苯、多烷基萘、芳基羧酸等高分子材料关键单体的绿色制备技术研究。基于孔道限域催化理念发展低碳烯烃与轻芳烃择形烷基化高效催化体系，可控制备分子筛基多孔催化材料，实现高择形催化活性

位点的精准构筑；揭示分子筛孔道限域与扩散传质的矛盾统一关系，阐明活性中心微环境与择形催化的高效协同规律；开发低碳烯烃/一氧化碳与轻芳烃择形烷基化/羰基化高效催化剂及技术，为关键芳香化学品单体的高效合成提供支撑。

考核指标：开发 3 - 5 种分子筛基高效择形催化剂，实现低碳烯烃/一氧化碳与轻芳烃择形烷基化/羰基化反应；基于孔道结构、活性位点与分子扩散的构效关系研究，构建分子筛孔道限域择形与扩散协同统一的科学理论体系；低碳烯烃单程转化率 $\geq 99\%$ 、同碳数芳烃产物中目标产品选择性 $\geq 95\%$ 、邻位异构体杂质 $\leq 0.5\%$ ，催化剂寿命 ≥ 1000 小时；发展择形催化领域的基础理论与工程制备技术，完成万吨级/年工业示范。

关键词：多烷基芳烃，分子筛多孔材料，孔道限域，择形烷基化，择形羰基化。

经费说明：概算经费参考数 2500 - 3000 万元。

6. 重要催化工业工艺流程再造

6.1 温和条件下合成氨及含氮精细化学品新工艺开发

研究内容：针对传统合成氨高温高压反应条件苛刻、能耗高、难以与波动性可再生能源耦合等问题，围绕低碳化、绿色化和柔性化制造需求，开发基于均多相融合的合成氨及其含氮精细化学品的热化学新工艺。探索氮气分子活化与转化关键步骤的微观本质与调控规律，发展氮气转化为含氮化

合物的新反应路径；理性设计实用型合成氨催化剂，建立适用于可再生能源波动输入的柔性合成氨工艺；针对传统氢氰化法制己二胺工艺原料剧毒、反应步骤繁琐及副产物多等问题，发展基于氨为原料的己内酰胺氨化制己二胺的绿色催化技术路线，研制新型高效氨基己腈催化剂，开展催化剂百公斤级放大研究。

考核指标：阐明氮气转化过程中 2~4 个关键基元过程的微观反应机理；开发 2-4 例氮气到含氮化合物直接转化的合成新方法。发展 1-2 种高效低温低压合成氨催化剂：在反应条件为 $\leq 375^{\circ}\text{C}$ 、 $\leq 5\text{ MPa}$ 和空速 10000 h^{-1} 时，单程出口氨浓度 $\geq 10\%$ ；完成催化剂 5000 小时以上的稳定性实验；实现千吨级/年合成氨工业中试。研制己内酰胺加氨制 6-氨基己腈（己二胺原料）催化剂：在反应温度 $\leq 350^{\circ}\text{C}$ 、氨酰比 ≤ 30 和液时空速 $\geq 1.0\text{ h}^{-1}$ ，己内酰胺转化率 $\geq 72\%$ ，6-氨基己腈选择性 $\geq 98\%$ ，实现催化剂百公斤级放大。

关键词：氮气，合成氨，氨衍生物，有机胺，温和条件。

经费说明：概算经费参考数约 2700 - 3000 万元。

6.2 电热催化甲烷无氧偶联新技术开发

研究内容：面向甲烷高效、低碳资源化利用，开发可再生能源驱动的甲烷催化转化新技术，解决催化剂易失活、积碳速率快、强吸热反应快速供热困难等关键难题。发展面向电热技术的原位表征技术，揭示多物理场下甲烷分子 C-H 键

活化、C-C 键偶联反应新机制；通过精准构筑晶格限域的活性位点，揭示金属位点结构对积碳的调控规律，开发可再生能源驱动的高稳定甲烷无氧转化催化材料；建立反应-传递动态耦合的动力学模型，揭示可再生能源供能的“三传一反”新规律；开发匹配电热催化的整体式多相催化反应器和新型反应系统，实现抗积碳与快速传热的高效耦合。

考核指标：研发基于焦耳效应的电热驱动甲烷无氧催化转化新工艺，攻克甲烷无氧转化供热效率低、积碳突出的技术瓶颈。开发 1-2 种整体式电热催化反应器和原料气处理量百万方/年规模电热驱动的高稳定性催化反应系统，实现整体式催化剂公斤级制备。开发电热驱动甲烷无氧转化制化学品与氢气新技术，实现甲烷转化率 $\geq 20\%$ ，碳基烯烃、炔烃、芳烃等高附加值化学品总选择性 $\geq 95\%$ ，催化反应区积碳率 $\leq 5\%$ ，催化剂和系统稳定运行 ≥ 100 小时。

关键词：甲烷，电热催化，无氧转化，积碳，焦耳热。

经费说明：概算经费参考数约 2700 - 3000 万元。

6.3 煤基二甲苯及芳烃衍生物等绿色催化技术开发

研究内容：围绕煤基甲醇、合成气和间接液化石油脑油等原料高值转化，开发高选择性制二甲苯及芳烃衍生物的绿色催化技术。发展工况下在线追踪表界面物种与积碳演变和活性中间体的谱学表征方法，明确催化反应机制和构效关系；开发扩散-反应耦合动力学模型和高效反应工艺；研究高性能

间接液化石脑油组分选择性脱氢、芳构化及烷基化催化剂，形成煤基石脑油-芳烃-长链烷基苯新技术。开发甲醇高效一步定向转化制芳烃联产烯烃催化剂，形成固定床甲醇制芳烃联产烯烃新技术。针对费托基路线产物中芳烃和对二甲苯选择性低的突出问题，开发新型合成气高选择性制对二甲苯双功能催化剂，阐明金属氧化物-分子筛双功能耦合催化体系的串联反应机理，大幅提高芳烃和对二甲苯产物选择性。

考核指标：发展原位/工况条件下表征方法，揭示分子筛和负载物种的协同作用机制和催化反应机制；完成煤基石脑油脱氢-芳构化-烷基化百吨级中试，脱氢过程($\alpha+\beta$)-烯烃总选择性 $\geq 60\%$ ，芳构化过程芳烃选择性 $\geq 75\%$ ，烷基化过程烷基苯选择性 $\geq 96\%$ ，单程寿命 ≥ 1500 小时。完成甲醇一步制芳烃联产烯烃百吨级中试，甲醇转化率 $\geq 99\%$ ，烯烃+芳烃选择性 $\geq 85\%$ ，单程寿命 ≥ 1000 h。开发煤基合成气制对二甲苯双功能催化剂，CO单程转化率 $\geq 30\%$ 、烃类产物中芳烃选择性 $\geq 60\%$ 、C8芳烃中对二甲苯选择性 $\geq 90\%$ 。

关键词：煤基石脑油，芳构化，烷基化，甲醇，合成气，二甲苯。

经费说明：概算经费参考数约 2700 - 3000 万元。